



TITLE:

アンダーソンモデルの熱的性質(アンダーソンモデルの厳密解とその応用に関する理論的研究,科研費研究会報告)

AUTHOR(S):

川上, 則雄

CITATION:

川上, 則雄. アンダーソンモデルの熱的性質(アンダーソンモデルの厳密解とその応用に関する理論的研究,科研費研究会報告). 物性研究 1984, 42(2): 12-21

ISSUE DATE:

1984-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91323>

RIGHT:

§1 はじめに

金属中の局在モーメントの生起の問題に対して提案されたアンダーソンモデルは近藤効果で代表される局所的な電子相関問題を具体的に取り扱いえるモデルとして s-d モデル同様、熱心な研究が為されてきた。またこのモデルは表面に吸着した原子の挙動や、希土類化合物の磁気振動の問題等にも適用され、固体物理学の種々の分野に幅広く応用されている。ここではバーテ反説の方法を用いて得られているアンダーソンモデルの厳密な結果について、熱力学的性質を中心に紹介する。§2, 3 でバーテ反説の方法、絶対零度の性質についてまとめを行い、§4 で熱力学的な性質について議論する。§5 では軌道縮退の効果を含めたアンダーソンモデルの有限温度での取り扱いに就くことにする。

§2 バーテ反説の方法

アンダーソンモデルは次のハミルトニアンで記述される¹⁾

$$\mathcal{H} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} + \sum_{k,\sigma} V_k [C_{k\sigma}^+ d_{\sigma} + d_{\sigma}^+ C_{k\sigma}] + \epsilon_d \sum_{\sigma} d_{\sigma}^+ d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^+ d_{\downarrow}^+ d_{\downarrow} d_{\uparrow}. \quad (2-1)$$

ここで ϵ_k (ϵ_d) は伝導電子 (不純物軌道) のエネルギー, U は不純物原子内での電子間クーロン相互作用, V_k は不純物レベルと伝導電子の状態を結ぶマトリックスエレメントである。このハミルトニアンに対して ① $V_k = V$ (k -dependence なし) という条件を付加すると、伝導電子の s 波成分のみが散乱されることになり、s 波の性質から問題が一次元に帰着される。さらにフェルミ面付近で状態密度一定、即ち ② $\epsilon_k = k$ (左レベルをエネルギー原点として選ぶ) という条件の下では、不純物問題を均一系の問題に焼き直すことができ、一次元均一系に用いられてきたバーテ反説の方法がアンダーソンハミルトニアン (2-1) に適用可能となる²⁾。その結果、アンダーソンハミルトニアンに対して、バーテ反説の方法に特有な形の基礎方程式が次の様に得られる²⁾

$$\exp(ik_j L) = \prod_{\beta=1}^M \frac{iB(k) - i\Lambda_{\beta} - UV^2/2}{iB(k) - i\Lambda_{\beta} + UV^2/2} \cdot \frac{k_j - \epsilon_d + iV^2/2}{k_j - \epsilon_d - iV^2/2}, \quad j=1 \sim N, \\ - \prod_{j=1}^N \frac{iB(k_j) - i\Lambda_{\alpha} + UV^2/2}{iB(k_j) - i\Lambda_{\alpha} - UV^2/2} = \prod_{\beta=1}^M \frac{i\Lambda_{\alpha} - i\Lambda_{\beta} - UV^2}{i\Lambda_{\alpha} - i\Lambda_{\beta} + UV^2}, \quad \alpha=1 \sim M, \quad (2-2)$$

ここで $B(k) = k(k - U - 2\epsilon_d)$, L は系の長さ, $N(M)$ は全電子数 (下向きスピン電子数) である。この場合、系の全エネルギーは上記の方程式の解 k_j を用いて $E = \sum k_j$ と表わされ、また全スピンの z 成分は $S_z = \frac{1}{2}(N - 2M)$ で与えられる。 k_j は quasi-momentum と呼ばれている量で、普通の意味での momentum とは異なり、 k_j の中に相互作用の効果が取り込まれている ($U \rightarrow 0$ の時は、 k_j は momentum の意味を持つ)。 Λ_{α} はスピン波に関する quasi-momentum に相当している。

§3 絶対零度の性質^{3),4)}

この節では絶対零度の性質について簡単にまとめる。 (2-2) 式で与えられる k_j の解の中でエネルギー別に一番低い状態を捜すと、 $B(k_\alpha^\pm) = \Lambda_\alpha \pm iUV^2/2$ (Λ_α は実数) を満足する複素解 k_α^\pm が基底状態を構成する解であることがわかる。このタイプの解が (2-2) の方程式を満足していることは、 $\text{Im } k_\alpha^\pm \geq 0$ で場合分けを行い、(2-2) の \exp の発散・収束を用いて容易にチェックできる³⁾。実数解 k_j はこの場合、磁場に関する励起状態を表わす解になっている。絶対零度の性質はこの2種類の解を用いて議論できるので、熱力学的極限を考えて、 Λ_α, k_j の分布関数 $\sigma(\Lambda), \rho(k)$ を導入すると、(2-2) より、 σ, ρ に関する積分方程式^{3),4)}

$$\begin{aligned} \sigma(\Lambda) - \int_{-\infty}^a R(\Lambda - \Lambda') \sigma(\Lambda') d\Lambda' + \int_{-\infty}^b Q(\Lambda - B(k)) \rho(k) dk &= \sigma_s(\Lambda), \\ \rho(k) + B'(k) \int_{-\infty}^b R(B(k) - B(k')) \rho(k') dk' + B'(k) \int_{-\infty}^a Q(\Lambda - B(k)) \sigma(\Lambda) d\Lambda &= \rho_s(k), \end{aligned} \quad (3-1)$$

が得られる。但し $B'(k) = dB(k)/dk$, $R(x), Q(x)$ はフリエ空間で $[1 + \exp(UV^2|w|)]^{-1}$, $\frac{1}{2} \text{sech}(UV^2\omega/2)$ で与えられる関数であり、 σ_s, ρ_s は

$$\begin{aligned} \sigma_s(\Lambda) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} Q(\Lambda - B(k)) \left[1 + \frac{1}{L} \frac{V^2}{(k - \epsilon_d)^2 + V^4/4} \right] dk, \\ \rho_s(k) &= \frac{1}{2\pi} \left[1 + \frac{1}{L} \frac{V^2}{(k - \epsilon_d)^2 + V^4/4} \right] + \frac{B'(k)}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(UV^2/2) \sigma_s(\Lambda) d\Lambda}{(B(k) - \Lambda)^2 + (UV^2/2)^2}, \end{aligned}$$

で与えられる。 σ, ρ を $\sigma = \sigma^c + \sigma^i/L$, $\rho = \rho^c + \rho^i/L$ と書いて、伝導電子と不純物からの寄与の部分に分けると、電荷及びスピンの励起に対する“フェルミレベル” a, b は

$$\int_{-\infty}^a \sigma^c(\Lambda) d\Lambda = (U + 2\epsilon_d)/2\pi, \quad \int_{-\infty}^b \rho^c(k) dk = H/2\pi \quad (H: \text{磁場}) \quad (3-2)$$

で決定され、局在電子数 n_d , 不純物部分の磁化 S_z は

$$n_d = 1 - \int_{-\infty}^a \sigma^i(\Lambda) d\Lambda, \quad S_z = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^b \rho^i(k) dk \quad (3-3)$$

から求められることになる。

(3-1) ~ (3-3) を用いると絶対零度、任意磁場での種々の物理量が σ^i, ρ^i 等を用いて形式的に書き下せる。例えば不純物部分のエネルギー E^i , 帯磁率 $\chi_m (\equiv dS_z/dH)$, 電荷感受率 $\chi_c (\equiv -dn_d/d\epsilon_d)$ は^{3),4)}

$$E^i = 2 \text{Re} \int_a^\infty k_\alpha^+ \sigma^i(\Lambda_\alpha) d\Lambda_\alpha + \int_{-\infty}^b (k - H/2) \rho^i(k) dk, \quad (3-4a)$$

$$\chi_m = \frac{1}{4\pi} [CaDb \rho^i(b)/\rho^c(b) - CbDa \sigma^i(a)/\sigma^c(a)] / [CaDb - CbDa], \quad (3-4b)$$

$$\chi_c = \frac{1}{\pi} [CaDb \sigma^i(a)/\sigma^c(a) - CbDa \rho^i(b)/\rho^c(b)] / [CaDb - CbDa], \quad (3-4c)$$

$$\text{但し. } C_x = [(\partial/\partial x) \int_{-\infty}^a \sigma^c(\lambda) d\lambda] / \sigma^c(a), D_x = [(\partial/\partial x) \int_{-\infty}^b \rho^c(k) dk] / \rho^c(b), x=a, b.$$

(3-1), (3-4) を解析的に計算することは一般に困難であるが、対称アンダーソンモデル ($U=2E_d$, 電気的中性の条件) で磁場が零の時の閉じ込め形に物理量が求まる。即ちこの場合 (3-4) 式は次の様になる。^{3), 4)}

$$[E_s^i - E_s^i(U=0)]/V^2 = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re}(1+iu) \ln(1+iu) - \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \frac{\sqrt{x} \operatorname{cosech} \pi(x+y^2)}{(y+\sqrt{u}/2)^2 + 1/4u}, \quad (3-5a)$$

$$\tilde{\chi}_m \equiv \pi V^2 \chi_m = \int_{-\infty}^\infty \frac{(1+u^2-4ux^2)e^{-\pi x^2} dx}{(1+u^2-4ux^2)^2 + 16u^3 x^2} + \frac{\pi}{2\sqrt{u}} \exp\left[\frac{\pi}{4}(u-1/u)\right], \quad (3-5b)$$

$$\tilde{\chi}_c \equiv \pi V^2 \chi_c/4 = \int_{-\infty}^\infty \frac{(1+u^2+4ux^2)e^{-\pi x^2} dx}{(1+u^2+4ux^2)^2 - 16u^3 x^2}, \quad u \equiv U/V^2 \quad (3-5c)$$

(3-5) が対称アンダーソンモデルの基本的な物理量の厳密解であるが、これらの物理量を u でべき展開すると、山田によって得られている摂動展開と一致した表式が出る。⁵⁾ $u \gg 1$ の s - d 極限では、予想される通り、 $\chi_c \rightarrow 0, \chi_m \rightarrow 1/(2\pi T_K)$ [$T_K = (\sqrt{UV^2}/\pi) \exp(-\pi U/4V^2)$] となり、 s - d モデルの値に近づく。^{6), 7)}

非対称アンダーソンモデル ($U \neq 2E_d$) の場合も、 $H=0$ の時は、Wiener-Hopf の方法を用いることにより、(3-1) を形式的に処理することができ、さらに $U \gg |E_d|, V^2$ の極限では、この方法を用いて、物理量を具体的に書き下せる。⁸⁾ 例えず $U \gg |E_d|, V^2$ の極限での近藤温度 T_K は

$$T_K = (\sqrt{UV^2}/\pi) \exp[\pi E_d(E_d+U)/UV^2], \quad (3-6)$$

と計算でき、⁸⁾ 今までに得られていた結果と一致する。^{9), 10)} さらにスケーリング則を用いて導き出されている effective な不純物レベルの表式¹¹⁾

$$E_d^* = E_d + (V^2/2\pi) \ln(i e U/2V^2), \quad (3-7)$$

も得ることができる。 U, E_d, H が任意の値を取る場合、Wiener-Hopf の手法は適用できないがこの場合の物理量は数値的に求められている。⁴⁾ 絶対零度における、この他の物理量として局在電子数、磁化曲線、磁気抵抗等の計算も、為されている。⁴⁾

§4 有限温度の性質¹²⁾⁻¹⁴⁾

絶対零度の性質は、複素解 $B(k_\pm^\pm) = \Lambda_\alpha \pm iUV^2/2$, と実数解 k_j で記述でき、有限温度になると、この他に spin complex と呼ばれる解が現われる。これは次の様になる。⁴⁾

$$\Lambda_\alpha^{n,l} = \Lambda_\alpha^n + i(n+1-2l)UV^2/2, \quad l=1 \sim n, n=1, 2, \dots, \infty, \Lambda_\alpha^n: \text{real}, \quad (4-1)$$

このタイプの解は n 個のスピンが "bound state" を作る状態に対応している。この spin complex に付随した解 $B(k_{\alpha}^{n,2}) = \Lambda_{\alpha}^{n,2} \pm iUV^2/2$ も有限温度では考慮しなければならない。熱力学ポテンシャルを最小にする様にこれらの解の分布を決定すると、その結果、熱平衡における熱力学ポテンシャルの表式とそれに付随した熱力学方程式が得られる。¹²⁾

$$\Omega^i = E_s^i + \frac{1}{2}U + E_d - T \int_{-\infty}^{\infty} \sigma_s^i G(\epsilon^+) d\Lambda - T \int_{-\infty}^{\infty} \rho_s^i G(-\mathcal{X}) dk \quad (4-2a)$$

$$\begin{cases} \mathcal{X}(k) = \mathcal{X}_s(k) + T \int_{-\infty}^{\infty} Q(B(k)-\Lambda) [G(\epsilon^+) - G(\epsilon^-)] d\Lambda, & (4-2b) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \epsilon_i^{\pm}(\Lambda) = T Q * G(\epsilon_i^{\pm}) - T \int_{-\infty}^{\infty} B'(k) Q(B(k)-\Lambda) G(\pm \mathcal{X}) dk, & (4-2c) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \epsilon_n^{\pm}(\Lambda) = T Q * [G(\epsilon_{n-1}^{\pm}) + G(\epsilon_{n+1}^{\pm})], & (4-2d) \end{cases}$$

* is convolution

$$\begin{cases} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\epsilon_n^+}{n} = U + 2E_d, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\epsilon_n^-}{n} = H, & (4-2e) \end{cases}$$

但し $G(x) = \ln(1 + e^{xT})$, ρ_s^i, σ_s^i は (3-1) 右辺の $1/\Lambda$ のオーダの項であり、 \mathcal{X}_s は $\mathcal{X}_s = k - \frac{1}{2}U - E_d + 2 \int_{-\infty}^{\infty} (k' - U/2 - E_d)^2 R[B(k) - B(k')] dk'$ で与えられる。

(A) 低温での性質¹²⁾

方程式 (4-2) を任意の温度で解析的に取り扱うことは困難であるが、低温での物理量は解析的に計算することが出来る。例えば Ω^i を T^2 のオーダまで計算することにより、電子比熱係数 γ_{imp} の表式が次の様に得られる (§5 の計算参照)。

$$\tilde{\gamma}_{imp} = 3V^2 \gamma_{imp} / 4\pi = V^2/8 [\sigma^i(a)/\sigma^c(a) + \rho^i(b)/\rho^c(b)] \quad (4-3)$$

さらに (3-4) と (4-3) を比較すると $\tilde{\gamma}_{imp}$ は $\tilde{\chi}_m$ と $\tilde{\chi}_c$ を用いて:

$$\tilde{\gamma}_{imp} = \frac{1}{2} (\tilde{\chi}_m + \tilde{\chi}_c) \quad (4-4)$$

と表わされることがわかる。¹²⁾ これは対称アンダーソンモデルに摂動展開を用いて得られていた⁵⁾ フエルニ流体的関係式であるが、任意の U, E_d, H に関してもこの関係式は成立する。対称モデルでは、 $H=0$ の場合、 $\tilde{\chi}_m, \tilde{\chi}_c$ が同じに形に求められていたの⁷⁾ $\tilde{\gamma}_{imp}$ も同じに形に求められる。この場合 $W = \tilde{\chi}_m / \tilde{\gamma}_{imp}$ は $U=0$ の一体内題の値 $W=1$ から U が大きくなるにつれて $S-d$ モデルの Wilson の値 $W=2$ に近づいてゆく。¹⁷⁾

(B) 帯磁率及び比熱の温度変化。^{13), 14)}

ここでは (4-2) の方程式を任意の温度で数値的に解いて得られている帯磁率、比熱の結果を次の 2 つの場合に分けて示す。

[1] 対称アンダーソンモデル (近藤効果に関連して)。

[2] 非対称アンダーソンモデル $U \gg |E_d|, V^2$ (価数揺動現象の簡単なモデルとして)。

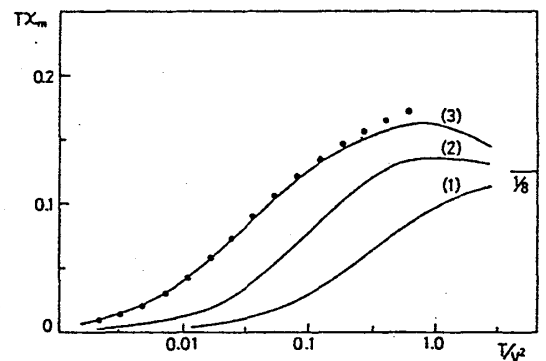
数値計算は方程式(4-2)を適当な n で打ち切り、 ϵ_n に相当な初期関数を与えて iteration scheme で実行した。帯磁率に関する結果はくり込み群により得られている結果と良好一致を示している¹⁰⁾。

(1) 対称アンダーソンモデル¹³⁾

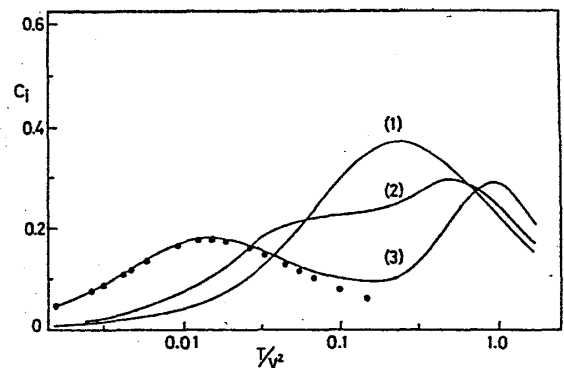
対称アンダーソンモデルに対する結果は図1,2に示されている。帯磁率のグラフを見ると高温では有効キュリー定数 TX_m が $1/8$ の値をとっているが、これは不純物の価電子数 $n_d = 0, 1, 2$ の状態が同等に励起されていることを表わしている。Uが零の場合、すなわち温度の低下に伴い TX_m は単調に減少し、高温状態から非磁性状態へ移ってゆく。一方Uが有限の時には、 TX_m の温度領域で TX_m が増加しているが、これは局在スピンが出現し易くなっていることを示している。しかし低温では s-d 交換相互作用による多体効果が効いて TX_m はやはり零に近づき、強結合の状態に落ち込む。この低温での振舞は近藤効果に他ならず、黒丸でプロットした s-d モデルの結果と良好一致を示している¹⁵⁾。Uを大きくしていく時、低温で近藤効果が徐々に出現する様子は (b) の比熱の温度変化にも顕著に現われている。比熱のグラフでUを大きくしていくと低温側に現われているピークが近藤効果に対応するもので $U/v^2 = 4.0$ では帯磁率同様、s-d モデルの結果と良好一致している¹⁵⁾。比熱に対する磁場の効果を示したものが図2である。近藤効果によって生じている低温側のピークが、磁場の出現によって free spin のショットキー型比熱に近づき、さらに高温側のピークに変化してゆく様子が分かる。このことは温度と同様に磁場によっても、多体的な束縛基底状態が壊されるということを示している。

(2) 非対称アンダーソンモデル¹⁴⁾

非対称アンダーソンモデル ($U \gg |E_d|, V^2$) に対する結果は図3,4に示されている。H=0として E_d の値を変えた時の帯磁率、比熱の温度変



(a)



(b)

図1: (a)有効キュリー定数 TX_m , (b)比熱 C_i . (1) $U/v^2 = 0$ (2) 2.0 (3) 4.0. 黒丸は s-d モデルの結果。

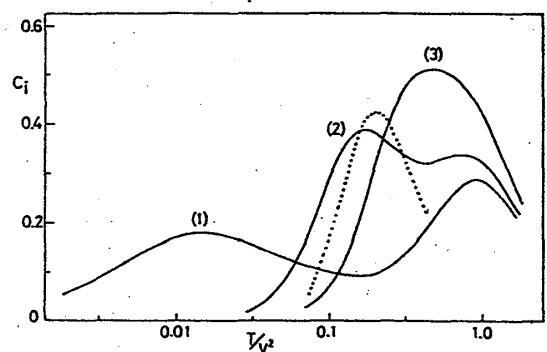


図2: 比熱の磁場による変化 $U/v^2 = 4.0$ (1) $H/v^2 = 0$, (2) 0.5 (3) 1.0 点線は free spin のショットキー比熱 $H/v^2 = 0.5$ に対しプロットしたもの。

化は図3にプロットしてある。高温領域 $T \gg U$ では対称モデルの場合と同様に、あらゆる状態が同等に励起され、 $TX_m \sim 1/8$, $C_i \sim 0$ となる。この場合は effective に電子-正孔対称性が成立しており $\langle n_d \rangle \sim 1$ となる。温度を下げてゆくと $n_d = 2$ の configuration space への励起が徐々に抑えられ、“価数揺動領域”と呼ばれる温度領域に入っていく^{(10),(14)}。この温度領域では $n_d = 0$ と $n_d = 1$ に対応する状態が同等に熱励起されており、 $TX_m \sim 1/6$, $C_i \sim 0$, $\langle n_d \rangle \sim 2/3$ という値で特徴づけられる。この高温 \rightarrow 価数揺動領域の転移 (gradual) に対応して、比熱にショットキー的振舞がみられる。温度がさらに低くなると、不純物レベル E_d の値によって物理的性質がかなり異なる。 E_d がフェルミ面よりかなり深い所に位置する場合に於 (曲線(1)) 価数揺動領域から一旦局在モーメントが出現して状態に移り、さらに低温で近藤効果を示す。これに対応して TX_m は $1/6 \rightarrow 1/4 \rightarrow 0$ と変化し、比熱は低温に2つのピークをもつことになる (この場合基底状態は $\langle n_d \rangle \sim 1$ の nearly integral valence)。一方 E_d がフェルミ面に近い場合 (曲線(2)) に於局在モーメントは出現せず、価数揺動領域から直接非磁性状態への転移が起こる。この場合 TX_m は $1/6$ 付近からすばやく零に近づき、比熱はこの転移に対応してやはりショットキー型のピークを示している。この時の基底状態は混合原子価状態になっている。比熱の磁場依存性に対する結果は図4に示してある。

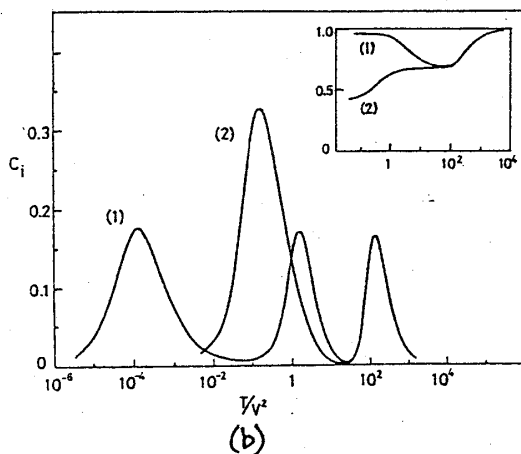
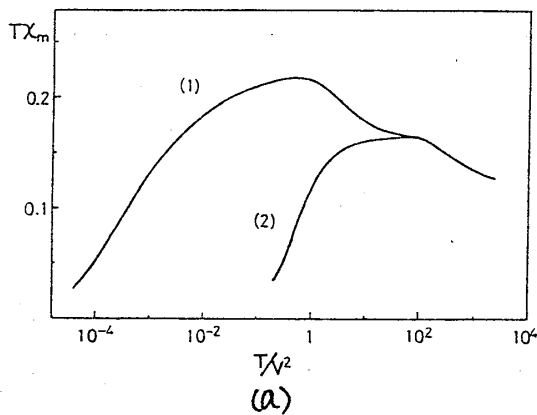


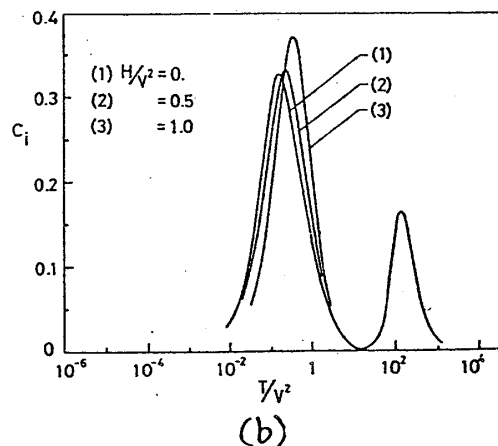
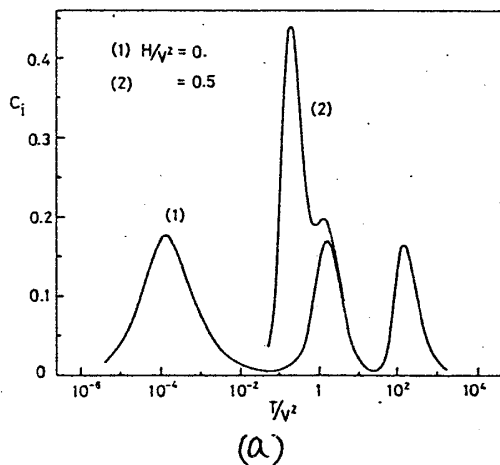
図3: (a)有効キリー定数 TX_m (b)比熱 C_i . $U/V^2 = 10^3 \pi$, (1) $E_d/V^2 = -10\%$ (2) 0. (b)に挿入されている図は局在電子数 $\langle n_d \rangle$ の温度変化。

図4: 比熱の磁場依存性。

$U/V^2 = 10^3 \pi$

(a) $E_d/V^2 = -10\%$

(b) $= 0$.



§5 縮退アンダーソンモデル^{16), 18)}

§4までの議論は不純物軌道に縮退はないものと仮定した。この節では不純物原子内での軌道縮退の効果を取り込んだ次の様な縮退アンダーソンモデルに対して熱力学方程式を導き、低温での電子比熱について議論する。

$$\mathcal{H} = \sum_{k,m} \epsilon_k C_{km}^+ C_{km} + \sum_{k,m} V_k (C_{km}^+ C_{fm} + C_{fm}^+ C_{km}) + \epsilon_f \sum_m C_{fm}^+ C_{fm} + U \sum_{m \neq m'} C_{fm}^+ C_{fm} C_{fm'}^+ C_{fm'} \quad (5-1)$$

但し、 $U \rightarrow \infty$ 。ここで C_{fm}^+ は不純物 f 電子に対する生成演算子であり、 m とし、 $(2J+1)$ 重に縮退した $4f^1$ configuration の Hund rule 基底状態を考える ($-J \leq m \leq J$)。伝導電子の状態は部分波を用いて表示しており、その生成演算子が C_{km}^+ である。§4までの $J = \frac{1}{2}$ アンダーソンモデルに対しては、 U が任意の値で厳密解が得られたが、この縮退アンダーソンモデルに対してベーター反説の方法が適用できるためには $U \rightarrow \infty$ という強相関の条件が必要となる¹⁶⁾。この様な強相関の条件はアンダーソンモデルを磁気揺動問題に適用する際に広く使われているものであり、(5-1) のハミルトニアンは熱力学的性質から、希土類不純物あるいは化合物の磁気揺動現象に対して有益な情報 (特に軌道縮退の効果について) が得られると期待される。

§2で付加したものと同じ仮定 ① $V_k = V$, ② $\epsilon_k = k$ の下で (5-1) に対するベーター・ヤン型の基礎方程式は Schlottmann より得られる¹⁶⁾。その表式は (2-2) の方程式に $U \rightarrow \infty$ の条件をつけて Sutherland の方法¹⁷⁾ でスピンの大きさを $\frac{1}{2} \rightarrow J$ に拡張したものを与える。

$$\exp(ik_p^{(0)} L) t(k_p^{(0)} - \epsilon_f) = \prod_{j=1}^{N_2} t(k_p^{(0)} - k_j^{(2)}), \quad (5-2)$$

$$-\prod_{j=1}^{N_j} t((k_p^{(0)} - k_j^{(j)})/2) = \prod_{r=1}^{N_{j-1}} t(k_p^{(0)} - k_r^{(j-1)}) \prod_{s=1}^{N_{j+1}} t(k_p^{(0)} - k_s^{(j+1)}), \quad 1 \leq j \leq 2J+1,$$

但し $t(x) = (x - ic)/(x + ic)$ で $C = V^2/2$ と定義した。ここで N_1 は系全体の全電子数、 $N_j - N_{j+1}$ (但し $N_{2J+2} = 0$) は角運動量の z 成分が $m = J - j + 1$ で与えられる電子の数を表わしている。(2J+1) 重縮退系に拡張したことから、(2-2) 式の Λ のかわりに $2J+1$ の変数 $k_p^{(j)}$ ($2 \leq j \leq 2J+1$) が新しく現われている。エネルギーは §4までと同様 $E = \sum k_p^{(0)}$ の表式で与えられる。

基底状態の方程式は文献¹⁶⁾ に与えられているのでここでは (5-1) に対する熱力学方程式を導く。方程式 (5-2) を用いて §3で行ったと同様の方法で解の分類を行い、熱平衡における不純物部分の熱力学的ポテンシャルの表式を求めると¹⁸⁾

$$\Omega^i = -T \sum_{j=1}^{2J+1} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta_j(k) G(-\epsilon_0^{(j)}) dk \quad (5-3)$$

但し $\Delta_j(k) = (jc/\pi) / [(k - \epsilon_f)^2 + (jc)^2]$ 。ここで擬エネルギー $\epsilon_0^{(j)}(k)$ は次の方

程式の解で与えられる:

$$E_n^{(j)}(k)/T = S_J * [G(E_n^{(j-1)}) + G(E_n^{(j+1)}) - G(-E_n^{(j)}) - G(-E_{n-1}^{(j)})], \quad 1 \leq j \leq 2J, \quad n=0,1,2,\dots,\infty \quad (5-4a)$$

$$E_0^{(2J+1)}(k)/T = k/T + R_J * G(E_0^{(2J+1)}) + \sum_{j=1}^{2J} P_j * G(-E_0^{(j)}) \quad (5-4b)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E_n^{(j)}/n = H$$

ここで S_J, R_J, P_j はフーリエ空間で $\frac{1}{2} \text{sech}(cw), e^{-c|w|} \sinh(2Jcw)/\sinh[(2J+1)cw], \sinh(jcw)/\sinh[(2J+1)cw]$ で与えられる関数であり、境界条件として $G(-E_n^{(2J+1)}) = G(-E_0^{(j)}) = G(E_n^{(0)}) = 0$ を追加してある。(5-3), (5-4) を用いることにより、ハミルトニアン(5-1)の熱平衡における物理量の計算と実行することが出来る。

(A) S-d limit

不純物のレベル E_f がフェルミ面より十分深い場合には (5-4b) の方程式は (5-4a) と decouple し、電荷揺動を記述している $E_0^{(2J+1)}$ は温度と含まない関数として求まる。このことは S-d 極限で電荷揺動が抑えられてスピンの自由度のみが熱的に励起されることに対応している。この場合 $E_0^{(2J+1)}$ は (5-4a) の方程式に known function として入り込み、この零とが S-d 極限での逆藤温度 T_K の表式を決定する。実際に T_K を見積ると、 $T_K = \text{const} \cdot \exp[-\pi E_f/(2J+1)c]$ と求まり、(5-4a) の方程式は Coghlin-Schrieffer モデル ($SU(2J+1)$ S-d モデル) の方程式と一致する。¹⁹⁾ Coghlin-Schrieffer モデルに関しては (5-4a) の方程式が任意温度 ($H=0$) で解かれ、比熱、帯磁率が求められている。²⁰⁾

(B) 低温での性質

任意温度での (5-4) の解析的取り扱いが困難であるが §4 でも述べた様に低温での物理量は解析的に求めることが出来る。上記の擬エネルギー $E_0^{(j)}$ を $E_0^{(j)} \sim \epsilon_j + T^2 \gamma_j$ と T^2 まで展開すると、 $\epsilon_j(k)$ は k の単調増加関数で、さらにある値 Q_j (いわゆるフェルミレベル) で $\epsilon_j(Q_j) = 0$ となることから分かる。低温での性質はこの Q_j 付近の関数の値により決定される。このことに注意して Ω^i を T^2 までべき展開することにより電子比熱係数 γ が Q_j をパラメータとして次の様に求まる:¹⁸⁾

$$\gamma = \frac{\pi}{6} \sum_{j=1}^{2J+1} P_I^{(j)}(Q_j) / P_C^{(j)}(Q_j), \quad (5-5a)$$

ここで P は次の方程式を満足する関数である。

$$\sum_{l=1}^j \sum_{i=l}^{2J+1} \int_{-\infty}^{Q_j} a_{i+j-2l}(k-k') P_I^{(i)}(k') dk' = \Delta_j(k) \quad 1 \leq j \leq 2J+1 \quad (5-5b)$$

$$\sum_{j=1}^j \sum_{i=l}^{2J+1} \int_{-\infty}^{Q_j} a_{i+j-2l}(k-k') P_C^{(i)}(k') dk' = \frac{j}{2\pi}$$

但し $a_n(k) = (nc/\pi)/(k^2 + (nc)^2)$ 。"フェルミレベル" Q_j は $\epsilon_j(Q_j) = 0$ の条件を $P_C^{(j)}$ で表現した式

$$\int_{-\infty}^{Q_j} \rho_c^{(j)}(k) dk = H/2\pi, \quad 1 \leq j \leq 2J, \quad \sum_{j=1}^{2J+1} \int_{-\infty}^{Q_j} \rho_c^{(j)}(k) dk = N_1 \lambda, \quad (5-6)$$

から決定される。ここで $\rho_I^{(j)}$ ($\rho_c^{(j)}$) は絶対零度における不純物部分 (伝導電子部分) の分布関数に他ならないことに注意すると、絶対零度の物理量も $\rho_c^{(j)}$ を用いて表示できる。3列目の帯磁率 χ_m および電荷感受率 χ_c は ($H=0$)

$$\chi_m = \frac{(J+1)(2J+1)}{12\pi} \sum_{j=1}^{2J} \rho_I^{(j)}(Q_j) / \rho_c^{(j)}(Q_j), \quad (5-7)$$

$$\chi_c = \frac{2J+1}{2\pi} \rho_I^{(2J+1)}(Q_{2J+1}) / \rho_c^{(2J+1)}(Q_{2J+1}),$$

で与えられる。(5-5a) と (5-7) を比較すると、電子比熱係数 γ は χ_m と χ_c を用いて

$$\gamma = \frac{2\pi^2}{(J+1)(2J+1)} \chi_m + \frac{\pi^2}{3(2J+1)} \chi_c \quad (5-8)$$

と表示でき、フェルミ流体的な関係式 (4-4) を縮退系に拡張したものから得られる (χ_m と χ_c の具体的な表式は文献16を参照)。§4で議論した $W = \chi_m / \gamma$ はこの場合、不純物レベル ϵ_f の位置により、 $(J+1)(2J+1)/2\pi^2$ [S-d limit] から $J(J+1)/\pi^2$ [フェルミ面より十分上方] まで変化する事が分かる。S-d極限での値 $(J+1)(2J+1)/2\pi^2$ は generalized Wilson's ratio と呼ばれている。¹⁹⁾

ここで定式化した熱力学方程式と実験との対比、さらに軌道縮退の効果により明確にするために、(5-4) の方程式を任意の温度で取り扱う必要がある。これについては計算と実行中である。

§6 おわりに

ここではベータ版説によるアンダーソンモデルの厳密解とその熱力学的性質を中心に述べてきた。この方法によって熱平衡における種々の物理量の定量的な計算が可能となり、今後の実験結果との具体的な対比が重要な課題となる。特に最近話題となっている希土類化合物の価数揺動現象と single impurity のモデルがどの程度まで説明し得るのかという問題が興味深いと思われる。これに関して、縮退アンダーソンモデルの有限温度の定量的な取り扱いからも有益な情報が得られると考えられる。さらに実験とのより広範な対比を行うために、有限温度の電気抵抗、その他の相関関数の定式化が望まれる。この問題はベータ版説の方法論の拡張にもつながる問題である。文献

- 1) P.W.Anderson: Phys. Rev. 124(1961)41.
- 2) P.B.Wiegmann: Phys. Lett. 80A(1980)63.
- 3) N.Kawakami and A.Okiji: Phys. Lett. 86A(1981)483.
- 4) N.Kawakami and A.Okiji: J. Phys. Soc. Jpn. 51(1982)1145,2043.
P.B.Wiegmann and A.M.Tsvelick: JETP Lett. 35(1982)120.
A.Okiji and N.Kawakami: Solid State Commun. 43(1982)365,
: J. Phys. Soc. Jpn. 51(1982)3192.
P.B.Wiegmann, V.M.Filyov and A.M.Tsvelick: JETP Lett. 35(1982)92.

- 5) K.Yamada: Prog. Theor. Phys. 53(1975)970.
- 6) K.Yosida and A.Yoshimori: Magnetism V(1973,Academic Press)253.
- 7) K.G.Wilson: Rev. Mod. Phys. 47(1975)773.
- 8) P.B.Wiegmann and A.M.Tsvelick: J.Phys. C16(1983)2281.
- 9) F.D.M.Haldane: J.Phys. C11(1978)5015.
- 10) H.R.Krishna-murthy, J.W.Wilkins and K.G.Wilson:
Phys. Rev. B21(1980)1003,1044.
- 11) F.D.M.Haldane: Phys. Rev. Lett. 40(1978)416.
- 12) N.Kawakami and A.Okiji: Solid State Commun. 43(1982)467.
: J. Phys. Soc. Jpn. 52(1983)1119.
V.M.Filyov, A.M.Tsvelick and P.B.Wiegmann: Phys. Lett. 89A(1982)157.
A.M.Tsvelick and P.B.Wiegmann: Phys. Lett. 89A(1982)368.
- 13) A.Okiji and N.Kawakami: Phys. Rev. Lett. 50(1983)1157.
- 14) N.Kawakami and A.Okiji: Phys. Lett. 98A(1983)54,
: Phys. Rev. Lett. 51(1983)2011.
A.Okiji and N.Kawakami: J. Appl. Phys. in press.
- 15) N.Andrei, K.Furuya and J.H.Lowenstein: Rev. Mod. Phys. 55(1983)331.
- 16) P.Schlottmann: Phys. Rev. Lett. 50(1983)1697.
- 17) B.Sutherland: Phys. Rev. Lett. 20(1968)98.
- 18) N.Kawakami, S.Tokuono and A.Okiji: J. Phys. Soc. Jpn. in press.
- 19) A.M.Tsvelick and P.B.Wiegmann: J. Phys. C15(1982)1707.
- 20) V.T.Rajan: Phys. Rev. Lett. 51(1983)308.

* アンダーソンモデルの厳密解の日本語の解説として.

興地斐男: 国体物理 18(1983)59,

興地斐男, 川上則雄: 日本物理学会誌 38巻, 9号(1983)716.

があります.